

潤滑油の耐摩耗性能予測における機械学習の適用 第2報

Application of Machine Learning in Anti-wear Performance Prediction of Lubricants (2nd report)

出光興産(正) *小林 兼士

Kenji Kobayashi

Lubricants Research Laboratory, Idemitsu Kosan Co, Ltd., Japan

1. 目的

既存のデータを数理モデルにより学習し、一定のルールやパターンを発見する方法である機械学習は、未知の結果の予測に用いることができる。本報では、潤滑油の耐摩耗性能の予測に適した数理モデルについて考察した。前報ではニューラルネットワークモデルを用いることで、重回帰およびロジスティック回帰よりも高い予測精度を持つ数理モデルが得られることを示した¹⁾。ニューラルネットワークモデルを活用する際の課題として、どの原材料が耐摩耗性能に寄与しているか解釈することが困難である点が挙げられる。その点を踏まえ、第2報では決定木分析によるモデル化を検討し、機械学習に適した数理モデルについて考察した。

2. 試料油・試験方法

検証にあたって試料油を調整した。添加剤を溶解させるベースオイルは、低粘度鉱油(以下、LV-BO, 100°C動粘度 2 mm²/s)と高粘度鉱油(以下、HV-BO, 100°C動粘度 6 mm²/s)のいずれかを選定した。添加剤はリン酸トリクリレジル(TCP, Tricresyl Phosphate)、ジベンジルジスルファイド(DBDS, Dibenzyl Disulfide)、過塩基性カルシウムスルホネート(OBCS, Overbased Calcium Sulfonate)、飽和脂肪酸(SFA, Saturated Fatty Acid)の4種類を選定した。添加剤の配合量はそれぞれ 0.00wt%、0.25wt%、0.50wt%の3種類から選定した。2種類のベースオイルと4種類の添加剤を3通りの濃度で独立して選定した場合の配合量の組み合わせは 162 通りであるが、その組み合わせから選定する基材・濃度の数が可能な限り等しくなるよう 50 通りの配合量(内 3 通りは重複)を選定した。

選定した 50 通りの配合量の組み合わせをランダムに並べ、耐摩耗性を順次評価した。耐摩耗性は四球摩耗試験(ASTM D4172 準拠)により、各試料油を同条件で評価した。試験球摩耗痕径が小さいほど、耐摩耗性が良好であると判断した。各試料油の配合量を説明変数とし、それぞれの試験球摩耗痕径を目的変数として、Table 1 に示すようなデータセットを作成した。なおベースオイルは LV-BO を 0、HV-BO を 1 とするダミー変数を設定した。

Table 1 Dataset (partially omitted)

No.	Explanatory variables (※Base oil “0” :LV-BO, “1” :HV-BO)					Objective variable Wear scar, mm
	Base Oil※	TCP, wt%	DBDS, wt%	OBCS, wt%	SFA, wt%	
1	0	0.00	0.50	0.00	0.50	0.60
2	0	0.50	0.50	0.00	0.50	0.33
3	0	0.25	0.00	0.25	0.25	0.31
...
24	1	0.50	0.25	0.00	0.25	0.33
25	1	0.50	0.25	0.25	0.50	0.31
26	0	0.25	0.00	0.00	0.50	1.55
...
48	1	0.25	0.50	0.50	0.25	0.33
49	0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.62
50	1	0.50	0.50	0.50	0.00	0.80

3. 検証方法

Table 1 に示すデータセットに対し、決定木分析と、比較として重回帰分析を行った。重回帰分析は Table 1 に示す各原材料の配合量を説明変数として、目的変数である摩耗痕径を求める重回帰式を算出した。決定木分析は、データセットを 2 つに分割する操作を繰り返して、説明変数と目的変数の関係をモデル化する手法であるが、2 つに分割するにあたっては、分割前後の平方残差和(RSS, Residual Sum of Squares)の差が最大になる基準にて分割を行った。決定木分析による分割を繰り返すと、学習データに過度にモデルが適合し、未知のデータを予測する性能が低下する現象である過学習(オーバーフィッティング)が生じる恐れがある。そのため分割数は情報量規準 AIC (An Information Criterion)を用いて決定した。AIC はモデルの確からしさ(尤度)が高いほど小さくなるが、一方でモデルのパラメータ数が大きいほど大きな値を示す指標である²⁾。本報の場合、分割を行うことで AIC が減少するが、過度にパラメータ数(分割数)を増やすと AIC が増加に転じる。AIC が増加するような分割数は、過学習が生じている恐れがあることから、AIC が最小となる分割数で得られたモデルが最良であるとして考察を進めた。

決定木分析で得られた結果を基に、耐摩耗性の向上に寄与する原材料の種類と配合量を読み取り、モデル化に用いたデータセット(Table 1)にはない配合量の組み合わせにて、解析結果の妥当性を判断した。

4. 検証結果と考察

重回帰分析の結果として、回帰式による予測値と実測値の関係を Fig.1 に示す。決定係数 R^2 は 0.16 と小さく、重回帰式によるモデル化は困難であると判断する。前報では、潤滑油原材料の配合量と耐摩耗性能は非線形な関係になり得るため、重回帰分析のような回帰分析によるモデル化は困難であると考察したが、今回のデータセットにおいても同様にモデル化が困難であったと考えられる。決定木分析の結果を Fig.2 に示す。分割数は AIC が最小となる 4 とした。決定係数 R^2 は 0.35 であり弱い相関であるが、重回帰分析より良好なモデルを作成することができた。

決定木分析で得られた結果(Fig.2)の妥当性を考察する。モデル化した結果によれば、耐摩耗性能の向上に最も有意に寄与したのは SFA であったことが読み取れる。そして SFA を 0.25wt%以上配合した場合、良好な耐摩耗性が期待できるのは、ベースオイルが高粘度(HV-BO)であった場合と、低粘度(LV-BO)でかつ TCP を 0.50wt%配合している場合である。一般に高粘度である方が、摩擦面に介在する油膜が厚くなるため、HV-BO であることで良好な耐摩耗性能が得られるという解析結果は妥当であると考えられる。一方、SFA を 0.25wt%配合した上で、TCP を 0.50wt%配合することで良好な耐摩耗性能が得られるという解析結果は、実測により妥当性を検証した。Table 2 に、Table 1 にはない配合量の組み合わせで、SFA と TCP の組み合わせによる耐摩耗性向上効果を検証した結果を示す。両添加剤を配合した場合にのみ、良好な耐摩耗性能が得られたことから、今回実施した試験条件においては、SFA と TCP の組み合わせを良好とする今回の解析結果は妥当であると判断する。

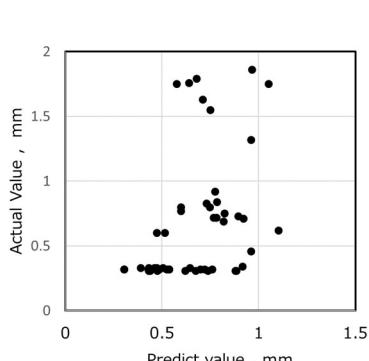


Fig.1 Actual and predicted value in multiple regression

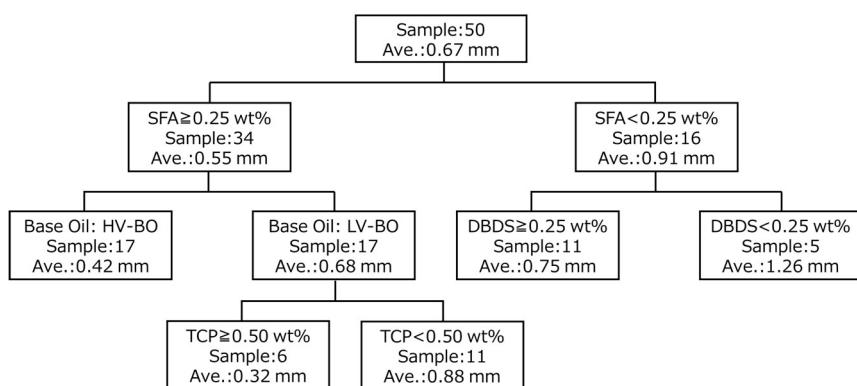


Fig.2 Result of decision tree analysis

Table 2 Result of additional evaluation (not listed in Table 1)

	Base Oil	TCP, wt%	DBDS, wt%	OBCS, wt%	SFA, wt%	Wear scar, mm
Test 1	LV-BO	0.00	0.00	0.00	0.50	1.95
Test 2	LV-BO	0.50	0.00	0.00	0.00	1.77
Test 3	LV-BO	0.50	0.00	0.00	0.50	0.32

5. まとめと今後の課題

今回決定木分析により得られたモデルは、重回帰分析により得られたモデルより良好な精度を示したものの、モデルにより得られた結果と実測値との相関は高くなかった。一方で、解釈しやすい解析結果を与えるモデルであることから、その結果を基に耐摩耗性能向上に寄与する原材料を見出すことができた。

決定木分析を繰り返し行って最適なモデルを探索するランダムフォレスト(RF, Random Forest)は、機械学習で一般的な手法の 1 つであり、例えば摩擦係数の予測において RF を適用し、RF による学習結果から特徴重要度を算出し、摩擦係数に影響を与える因子を探索する研究も報告されている³⁾。本報の場合、RF のような機械学習は検討できなかったものの、決定木分析の有用性は確認できた。そのため、今回とは異なるデータセットを活用することで、RF による耐摩耗性能の予測がどの程度有効であるかどうか検証することが、今後の課題の 1 つであると考える。

- 1) 小林：潤滑油の耐摩耗性能予測における機械学習の適用、トライボロジー会議 2023 春 東京 予稿集, (2023) D30
- 2) 赤池：モデルを通してデータを読む、トライボロジスト, 40, 7, (1995), 573-578
- 3) 野間・青木・小林：異種添加剤併用系における鋼の摩擦係数予測に向けた機械学習の応用、トライボロジー会議 2022 秋 福井 予稿集, (2022) B29.